角度相关函数与径向分布函数分析微组织结构

陈家轩[1,2]，卜琳华[3]，梁迎春[1]，王立权[2]，鞠晓峰[3]

(1. 哈尔滨工业大学 机电学院，150001 哈尔滨，chenjiaxuan@hit.edu.cn；2. 哈尔滨工程大学 机电学院，150001 哈尔滨；
3. 哈尔滨工业大学 经济与管理学院，150001 哈尔滨)

摘 要：为了研究纳米加工过程导致材料组织结构的变化，采用分子动力学方法，构建了单晶铜耦合纳动纳米加工模型，并进行了纳米切削过程仿真.提出采用角度相关函数(ADF)结合径向分布函数(RDF)方法，分析单晶铜耦合纳动加工过程中材料亚表面组织结构变化.模拟结果表明，单晶铜(111)表面耦合纳动加工过程中，在材料的亚表面原子存在从密排六方排列转变为面心结构排列的不稳相变.

关键词：角度相关函数；径向分布函数；切削；相变；纳米

中图分类号：TP146.1 **文献标志码**：A **文章编号**：0367-6234(2011)05-0043-04

Analysis of material microstructure change by ADF and RDF methods

CHEN Jia-xuan[1,2], BU Lin-hua[3], LIANG Ying-chun[1], WANG Li-quan[2], JU Xiao-feng[3]

(1. School of Mechatranics Engineering, Harbin Institute of Technology, 150001 Harbin, China, chenjiaxuan@hit.edu.cn;
2. School of Mechanical and Electrical Engineering, Harbin Engineering University, 150001 Harbin, China;
3. School of Management, Harbin Institute of Technology, 150001 Harbin, China)

Abstract: To research the microstructure change in nanomachining process, a coupling nanofretting nanomachining model of single crystal copper is presented using molecular dynamics methods, and nanocutting processes are simulated. By angle distribution function (ADF) and radial distribution function (RDF), the structure changes of subsurface in material are analyzed, and the results show that there exists an unstable phase transition from the close-packed hexagonal structure to face-centered cubic structure in the subsurface of single crystal copper during coupling nanofretting nanomachining process.

Key words: angle distribution function; radial distribution function; cutting; phase transition; nano

微纳构件的设计和使用必须要考虑由于加工制造过程所产生的微观缺陷、表层及亚表层材料组织结构变化等因素对微纳构件力学特性和使用性能的影响.悉尼大学的 L C zhang 等[1-2]运用分子动力学仿真技术对单晶塑性及脆性材料的微切削加工进行了研究，认为在切削过程中单晶硅的变形主要是非晶相变.美国 Y Y Ye 等[3]分析了瞬态原子位图，认为在高速切削下，材料获得的表面较粗糙；而在较低切削速度下，材料可获得较好的表面，但经过退火后，材料内部缺陷消失.美国 R Komanduri 等[4-5]发现材料、晶向对工件的切屑去除以及材料内部缺陷的产生、演化有重要影响.通过观察分析瞬态原子位图，认为切屑是以类似挤压方式去除的.哈工大梁迎春等[6-7]利用分子动力学原理在原子尺度模拟了单晶铜纳构件的纳米加工过程，通过径向分布函数分析，认为加工后的纳构件的有序度明显下降.程东等[8]认为在原子尺度，黏-滑效应可以解释为位错机制，即摩擦表面间位错的产生与消失的过程.英国学者 Mulliah 等[9-10]模拟了金刚石针尖对单晶银(100)表面纳刻划过程，用邻近原子数方法分析表明，刻槽的底部有较少的亚表面缺陷，表面的堆垛原子与刻划方向直接相关.北航的王广海等[11]利用径向

收稿日期：2010-10-21.
基金项目：国家杰出青年基金资助项目(50925521)；国家自然科学基金资助项目(51075092)；黑龙江省自然科学基金资助项目(E200903)；教育部人文社科基金资助项目(10YJC630008).
作者简介：陈家轩(1972—)，男，博士后；
梁迎春(1964—)，男，教授，博士生导师；
鞠晓峰(1956—)，男，教授，博士生导师；
王立权(1957—)，男，教授，博士生导师.

分布函数进行研究,发现在高应变率条件下,纳米线内部原子排列有序度峰值较比低应变率条件下的峰值向左偏移. 上述研究主要通过观察分析原子位图采用邻近原子数方法及径向分布函数方法分析材料组织结构变化,而采用径向分布函数结合角度相关函数方法分析材料组织结构变化的相关研究还鲜有报道.

本文采用分子动力学方法研究单晶铜耦合纳动纳米加工过程. 利用径向分布函数结合角度相关函数,从径向和角度相关性两方面综合分析耦合纳动纳米加工过程中材料的组织结构变化.

1 模型与方法

1.1 分子动力学模型及方法

工件原子之间的势函数采用能够精确反映原子间相互作用的 EAM 势[12-13]. 其核心思想是晶体的总势能由晶格点阵上原子晶格原子之间的相互作用对势能和原子核镶嵌在背景电子云的嵌入能两部分,其中势能函数为

$$E = \sum_{i}^{N} [F(\rho_i) + \sum_{j>i}^{N} u(r_{ij})],$$

$$\rho_i = \sum_{j} f(r_{ij}).$$

式中, E 为总能量, $F(\rho_i)$ 和 $u(r_{ij})$ 分别为嵌入能和对势能, $f(r_{ij})$ 为电子密度分布函数, N 为临近原子数, r_{ij} 为原子 i 和原子 j 之间瞬态距离.

工件与刀具原子之间的势函数采用较精确且运算效率较高的 Morse 势函数. 算法采用 Verlet-velocity 法的速度形式. 牛顿区及恒温区中原子运动符合经典牛顿运动定律,为保证切削过程中温度恒定,恒温区原子采用 Nose-Hoover 热浴进行温度调节[14].

1.2 角度相关函数

径向分布函数(RDF)无论对于具有规则结构的晶体、还是像液体或非晶体这样不具有规则结构的物质状态都是非常有用的物理方法. 径向分布函数可以描述固体中原子排列的有序程度,主要是描述原子排列径向的有序度[15]. 但是,径向分布函数仅能从径向描述原子排列的有序度,不能完全反应材料原子的排列变化,因此,本文提出采用原子角度相关性结合径向分布函数描述材料内部组织结构变化及原子之间的位置关系.

本文依据径向分布函数方法构造了角度相关性函数(ADF). 根据统计物理学,在正则系综情况下,角度相关性分布函数 $g(\theta)$ 是两体分布函数 $g(\theta,\theta')$ 在角度方向平均而得到的,其中两体分布函数 $g(\theta,\theta')$ 计算公式为

$$g(\theta,\theta') = \frac{\rho^{(2)}(\theta,\theta')}{\rho^2}.$$

式中: $g(\theta,\theta')$ 为原子在 θ 和 θ' 处的几率密度; $\rho(\theta,\theta')$ 为微元的局部密度; ρ 为体系原子平均密度.

采用分子动力学计算径向分布函数的方法见图 1.

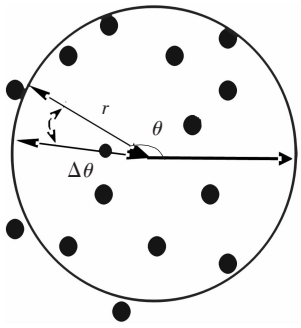


图 1 角度分布函数的计算方法

计算进入限定半径 r 范围内且在 $\theta \to \theta + \Delta\theta$ 之间的原子数 $< n(\theta,\theta+\Delta\theta) >$,将其作系综平均,乘以归一化系数,则角度分布函数为

$$g(\theta) = \frac{3 < n(\theta,\theta+\Delta\theta) >}{2 \cdot r^3 \cdot \Delta\theta \cdot N(N-1)}.$$

其中 N 为体系的粒子数.

二维可简化为

$$g(\theta) = \frac{< n(\theta,\theta+\Delta\theta) >}{r^2 \cdot \Delta\theta \cdot N(N-1)},$$

系综平均为

$$< n(\theta,\theta+\Delta\theta) > = \frac{1}{N_s} \sum n(\theta,\theta+\Delta\theta \mid N).$$

采用分子动力学模拟的各个时间步的数据平均时的样本 N_s.

通过分析纳米加工过程中工件内部原子的角度相关性,耦合径向分布函数及缺陷原子量化辨识方法,可以更加确切分析纳米加工过程中切屑的去除,从原子角度理解纳米加工机理,分析加工过程中工件内部组织结构变化,为微纳构件的力学特性分析提供理论基础.

1.3 纳米加工模型及方法

单晶铜表面耦合纳动切削的分子动力学模型如图 2 所示. 在仿真模型中分为 2 个部分:加工工件(单晶铜)、加工刀具(三棱锥针尖). 其中被加工工件分为 3 个部分:底层原子是边界区原子如图 2 中箭头 C 所示;紧挨着边界区原子的是恒温区原子如图 2 中箭头 B 所示;最上面的原子是牛顿区原子如图 2 中箭头 A 所示. 为实现纳构件表面耦合纳动切削过程,加工工具除了在 z 轴方向在每步施加一个位移增量外,还需在 x 轴方向施

加一个耦合位移增量，来实现加工工具在纳构件表面的耦合运动. 通过在 x 轴方向施加位移的大小来实现要求的刀具规划路径. 若 x 轴的增量是 z 轴增量的线性函数，则可实现加工工具的斜向切削，通过调整 x 轴增量的大小，可调节加工工具加工路径与 z 轴夹角的大小. 若加工工具在 x 轴施加的耦合纳动位移增量是其在 z 轴方向的非线性函数，则可实现相应的曲线规划路径，如可实现圆、椭圆、或其他的曲线加工规划轨迹.

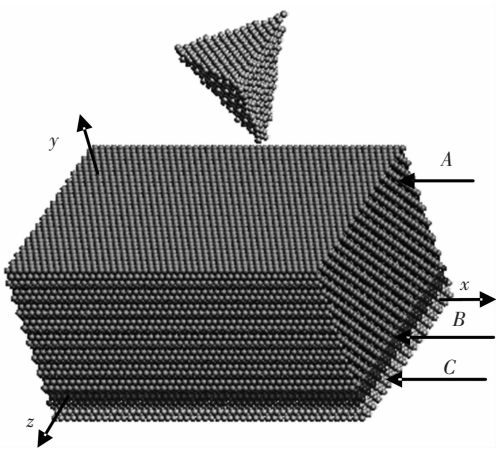


图 2　单晶铜表面耦合纳动加工分子动力学模型

2　结果与讨论

为分析耦合纳动加工对工件亚表面变形层的影响，需对工件亚表面原子构型及其缺陷演化进行分析. 在三棱锥针尖耦合纳动切削单晶铜(111)表面过程中，单晶铜亚表面的原子位图及其原子的径向有序度和相角相关度分别如图 3 ~ 5 所示.

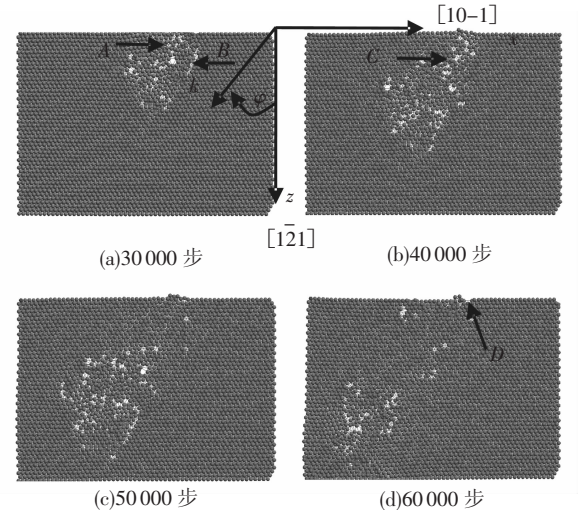


图 3　单晶铜表面耦合纳动加工亚表面原子位图

图 3 为加工工具耦合纳动切削(111)表面过程中在刀具的尖端下工件内第二层原子不同阶段的瞬态原子位图. 刀具切削方向如图 3 中箭头 k 所示，箭头 k 与 z 轴的夹角为耦合纳动夹角 φ，为 45°. 从图 3(a)可以看出，在初始切削过程中，刀具下面的工件原子由于刀具的剪切、挤压作用，在工件的亚表面形成一些空位、间隙原子等点缺陷(如图 3(a)中的箭头 A 所示). 同时也形成位错等线缺陷(如图 3(b)中箭头 B 和 C 所示). 随着切削工具的继续前进，这些存在于亚表面的缺陷并不是固定不动的，而是在其周围原子的相互作用及本身原子的热运动作用下发生位置迁移. 切削工具经过后的工件亚表层内，一部分空位缺陷会经过运动后相互接触，结合形成更大的空位簇，一部分间隙缺陷原子会运动到空位处，填补空位缺陷，经过驰豫后形成稳定的理想晶格(如图 3(b)中箭头 C 所示)，这说明工件原子具有较强的“自愈”能力. 但在初始阶段新产生的缺陷的数量还是远大于经过原子间相互作用及热运动而恢复的数量. 随着切削过程的继续，切削后残留的缺陷原子经过不断的位置迁移，导致有较多的缺陷湮灭，经过不断的弛豫过程而形成理想晶格；其中部分缺陷经过运动，位置迁移到达工件的表面，在工件的表面形成或突出、或凹陷的原子台阶(如图 3(b)中箭头 D 所示)，致使工件内部的缺陷原子数量降低，使工件内部新产生的缺陷原子数量和湮灭的原子数量相近，亚表面总体上的缺陷原子数量趋于相对稳定.

工件的亚表面原子的有序度和相角相关性可检验和预测亚表层缺陷的变化. 利用角度相关函数和径向分布函数相结合方法，可从角度相关性和径向分布综合反应材料内部组织结构变化. 工件亚表面原子径向有序度和角度相关度曲线如图 4 和 5 所示. 从图 4 中可以看出，工件经过切削工具切削加工后 50 000 步和 60 000 步的原子的有序度没有明显的降低，其径向距离分别为 $1.414a_0$、$1.224a_0$、$1.87a_0$ 等处的有序度的峰值基本一致. 值得注意的是在切削过程进行到50 000 步时，其有序度曲线在径向距离为 $1.0a_0$ 及 $1.57a_0$ 等处出现了峰值；同时从图 5 中也可看出，工件亚表面的原子相角相关度曲线也在 22.5°、45.0°及 67.5°等处出现了峰值点(如图中 A 点所示)，与面心立方晶格的角度相关性相符，这说明在切削过程中工件的亚表面部分原子发生了不稳定相变. 但在切削过程进行到 60 000 步时，其亚表层径向有序度和角度相关性峰值明显降低甚至消失. 表明随着切削的进行，在切削过程中，工件内部分原子实现了从密排晶格转变为立方晶格的不稳相变过程，在经过弛豫后又恢复到更加稳定

的密排六方构型.

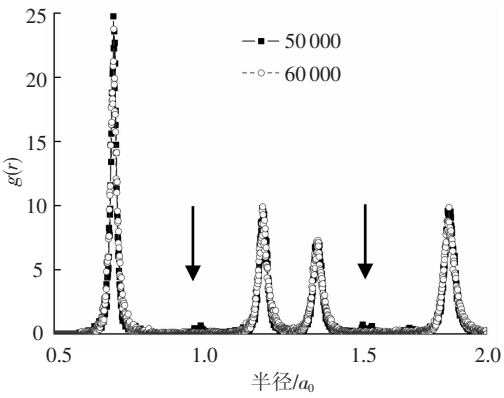


图4　亚表面有序度

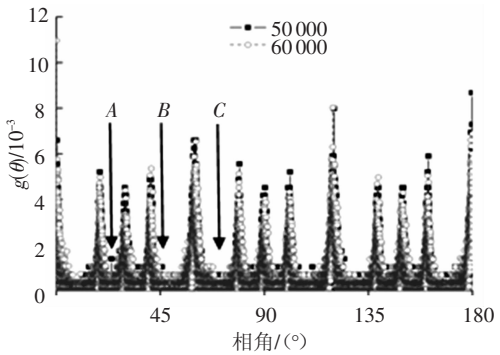


图5　亚表面相角相关度

3　结　论

1)采用角度相关函数和径向分布函数相结合方法,可从角度相关性和径向分布综合分析材料内部组织结构变化.

2)在单晶铜(111)表面耦合纳动加工过程中,发现在纳构件的亚表面现存原子从密排六方排列转变为面心结构排列的不稳相变过程,经过驰豫后又恢复到密排六方排列,有明显的"自愈"能力.

参考文献:

[1] ZHANG L C, TANAKA H. Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale: a molecular dynamics Analysis [J]. Wear, 1997, 211(10): 44 – 53.

[2] ZHANG L C, TANAKA H. Atomic scale deformation in silicon monocrystals induced by two-body and three-body contact sliding [J]. Tribology International, 1998, 31(8): 425 – 433.

[3] YE Y Y, BISWAS R, MORRIS J R, *et al.* Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper [J]. Nanotechnology, 2003, 14(3): 390 – 396.

[4] KOMANDURI R, CHANDRASEKARAN N, RAFF L M. Some aspects of machining with negative-rake tools simulating grinding: a molecular dynamics simulation approach [J]. Philosophical Magazine B, 1999, 79(7): 955 – 968.

[5] KOMANDURI R, CHANDRASEKARAN N, RAFF L M. Molecular dynamics simulation of atomic-scale friction [J]. Physical Review B, 2000, 61(20): 14007 – 14019.

[6] 梁迎春,陈家轩,白清顺,等. 纳米加工及纳构件力学特性的分子动力学模拟 [J]. 金属学报, 2008, 44(8): 119 – 124.

[7] CHEN J X, LIANG Y C, CHEN M J, *et al.* A study of the subsurface damaged layers in nanoscratching process [J]. International Journal of Abrasive Technology, 2009, 2(4): 368 – 381

[8] 程东,严志军,严立. 单晶 Cu 表面黏 – 滑效应的分子动力学模拟 [J]. 金属学报, 2006, 42 (11): 1149 – 1152.

[9] MULLIAH D, CHRISTOPHER D, KENNY S D, *et al.* Nanoscratching of silver (100) with a diamond tip nuclear [J]. Instruments and Methods in Physics Research B, 2003, 202(6): 294 – 299.

[10] SMITH R, MULLIAH D KENNY S D, *et al.* Stick slip and wear on metal surfaces [J]. Wear, 2005, 259(1 – 6): 459 – 466.

[11] WANG G H, PAN H, KE F J, *et al.* Study of mechanical properties of amorphous copper with molecular dynamics simulation [J]. Chinese Physics B, 2008, 17(1): 0259 – 0264.

[12] JOHNSON R A. Analytic nearest-neighbor model for FCC metals [J]. Physical Review B, 1988, 37(8): 3924 – 3931.

[13] JOHNSON R A. Alloy models with the embedded-atom method [J]. Physical Review B, 1989, 39 (17): 12554 – 12559.

[14] LIANG Y C, CHEN J X, CHEN M J, *et al.* Integrated MD simulation of scratching and shearing of 3D nanostructure [J]. Computational Materials Science, 2008, 43(4): 1130 – 1140.

[15] HALPERIN B I, NELSON D R. Theory of two-dimensional melting [J]. Physical Review Letter, 1978, 41(2), 121 – 124.

(编辑　杨　波)